

# VU Research Portal

## Wetenschap langs de Digitale Snelweg: Virtueel kan alles

Bal, H.E.

2000

### **document version**

Publisher's PDF, also known as Version of record

[Link to publication in VU Research Portal](#)

### **citation for published version (APA)**

Bal, H. E. (2000). *Wetenschap langs de Digitale Snelweg: Virtueel kan alles*. Vrije Universiteit.

### **General rights**

Copyright and moral rights for the publications made accessible in the public portal are retained by the authors and/or other copyright owners and it is a condition of accessing publications that users recognise and abide by the legal requirements associated with these rights.

- Users may download and print one copy of any publication from the public portal for the purpose of private study or research.
- You may not further distribute the material or use it for any profit-making activity or commercial gain
- You may freely distribute the URL identifying the publication in the public portal ?

### **Take down policy**

If you believe that this document breaches copyright please contact us providing details, and we will remove access to the work immediately and investigate your claim.

### **E-mail address:**

[vuresearchportal.ub@vu.nl](mailto:vuresearchportal.ub@vu.nl)

# Wetenschap langs de Digitale Snelweg: Virtueel kan alles

Henri E. Bal  
Divisie Wiskunde en Informatica  
Divisie Natuurkunde en Sterrenkunde  
Faculteit der Exacte Wetenschappen  
Vrije Universiteit

This page intentionally left blank

# Inleiding

Mijnheer de Rector Magnificus,  
Geachte toehoorders,

Het zal niemand ontgaan dat onze maatschappij aan het veranderen is door boeiende ontwikkelingen op het gebied van informatie en communicatietechnologie. Met name het Internet heeft een grote invloed op onze samenleving. De media besteden vooral aandacht aan economische toepassingen en aan de kansen voor de amusementsindustrie. Die aandacht is zeker terecht, maar daarnaast is het ook nuttig om te zien wat de nieuwe technologieën betekenen voor wetenschappelijke toepassingen. Zeker toepassingen in de natuurwetenschappen stellen hoge eisen aan informaticatechnieken, en kunnen daardoor een goede stimulans zijn voor Informatica-onderzoek. Het world wide web is ook zo ontstaan. Het web is niet bedacht om makkelijker boodschappen te kunnen doen of leuke spelletjes te kunnen spelen. Het is ontstaan door een vraag vanuit de natuurkunde om wereldwijde toegang te krijgen tot gegevens en documenten over kernfysica-experimenten. De oplossing voor dit probleem (het web) is overigens ook bedacht door natuurkundigen.

Ik wil graag stilstaan bij belangrijke ontwikkelingen in de informatica en hun samenhang met wetenschappelijke toepassingen. Ik zal daarbij optimaal gebruik proberen te maken van mijn aanstelling in twee verschillende divisies. Vanuit mijn leerstoel 'Natuurkundige Informatica en methoden voor grootschalig parallel rekenen' ben ik nauw betrokken bij onderzoek op beide gebieden, de informatica en de natuurwetenschappelijke toepassingen.

Concreet zal ik ingaan op drie ontwikkelingen die voor zowel de informatica als de natuurkunde belangrijk zijn: parallel rekenen, virtuele werkelijkheden en het Internet. Bij elk van deze technologieën is er een duidelijke vraag van de kant van wetenschappelijke gebruikers (zie Tabel 1). Parallel rekenen is het antwoord op de vraag naar veel meer rekenkracht; virtuele werkelijkheden bieden een veel natuurlijkere interactie met computers; en het Internet maakt vele vormen van samenwerking op afstand mogelijk. Vooral de combinatie van deze drie ontwikkelingen opent de weg naar geheel nieuwe soorten toepassingen. Ik denk dat we veel vooruitgang op deze gebieden kunnen boeken door onderzoek aan vraag- en antwoord-zijde te combineren, dus onderzoek aan informatica-methoden en toepassingen hand in hand te laten gaan. Maar laat me eerst iets meer over de drie gebieden zeggen.

Veel wetenschappelijke toepassingen worden gekenmerkt door een vraag naar zeer veel rekenkracht, veel meer dan geleverd kan worden door één enkele computer. Rekenkracht is vooral belangrijk bij *computersimulaties*, dat zijn programma's die een verschijnsel uit de werkelijkheid nabootsen en doorrekenen op een computer. Veel wetenschappers willen met computersimulaties verschijnselen verklaren, uitgaande van de elementaire bouwstenen of natuurwetten, waar-

| <i>Vraag gebruikers</i> | <i>Technologische ontwikkeling</i> |
|-------------------------|------------------------------------|
| Rekenkracht             | Grootschalig parallel rekenen      |
| Natuurlijke interactie  | Virtuele werkelijkheden            |
| Samenwerking op afstand | Internet                           |

Tabel 1: Overzicht ontwikkelingen

door een enorme vraag naar rekenkracht ontstaat. De informatica technologie die een antwoord geeft op deze vraag naar rekenkracht is parallel rekenen. Hierbij werken een groot aantal computers samen aan één probleem, om dit sneller door te kunnen rekenen. Door de opkomst van het Internet wordt het zelfs mogelijk om computers op verschillende plaatsen samen te laten werken. Op die manier kunnen zeer grootschalige berekeningen worden gedaan.

Een tweede onderzoeksgebied in opkomst is dat van de interactieve toepassingen. Vanuit de toepassingshoek is er niet alleen vraag naar meer rekenkracht, maar ook naar een meer natuurlijke interactie met computersystemen. Momenteel kunnen gebruikers kiezen uit het intypen van cryptische commando's of het indirect manoeuvreren van een pijltje op een beeldscherm door een klein doosje heen en weer te bewegen. In beide gevallen moeten de gebruikers meestal lang wachten op de resultaten, zeker als het gaat om ingewikkelde simulatieprogramma's. Wat gebruikers willen is een directe controle over lopende berekeningen, en op een meer natuurlijke manier. Zo'n natuurlijke interactie wordt mogelijk gemaakt door virtuele werkelijkheden (virtual realities). Een virtuele werkelijkheid is een drie-dimensionale grafische omgeving waarin een (al of niet in de reële wereld bestaande) situatie visueel kan worden nagebootst. Hiermee kunnen de resultaten van een programma worden gevisualiseerd, en het wordt mogelijk om de gebruiker in die visuele wereld het programma te laten sturen.

Het derde gebied dat ik zal behandelen is samenwerking op afstand. Zeker bij multidisciplinair onderzoek willen wetenschappers op verschillende locaties samenwerken via computersystemen. Computernetwerken, zoals het Internet, zijn de technologische drijfveer voor deze ontwikkeling. Bij wetenschappelijke toepassingen gaan de eisen tegenwoordig verder dan toegang tot gemeenschappelijke documenten. Gebruikers willen directe interactie kunnen hebben via simulatieprogramma's, gegevensbanken of zelfs via instrumenten. Het ondersteunen van dit soort interacties op afstand stelt hoge eisen aan de Internet-technologie.

Op alle drie deze gebieden wordt veel onderzoek gedaan en zijn er al aansprekende toepassingen gerealiseerd. Er zijn parallelle programma's gedraaid op duizenden computers tegelijk, en in één geval zelfs op meer dan een miljoen; er zijn virtual-reality-systemen gemaakt waarmee gebruikers moleculen of sterrenstelsels kunnen bekijken en veranderen; en er bestaan toepassingen waarmee wetenschappers aan weerszijden van de Atlantische oceaan samenwerken, zonder veel te merken van de fysieke afstand. Hoewel deze toepassingen vrijwel allemaal op een ad-hoc manier zijn gemaakt, kunnen we er veel van leren.

Een grote uitdaging is hoe we de inzichten uit al deze ad-hoc studies kunnen gebruiken om toepassingen op grotere schaal mogelijk te maken. Het uiteindelijke doel is dat de nieuwe technologieën routinematig gebruikt kunnen worden, in plaats van alleen in experimenten.

In de rest van mijn lezing zal ik ingaan op deze drie deelgebieden en op hun samenhang. Ik zal concrete voorbeelden beschrijven van toepassingen die al zijn gerealiseerd, en die een voorbode zijn van wat we kunnen verwachten. Daarna zal ik de belangrijkste onderzoeksvragen behandelen die moeten worden beantwoord om dit soort toepassingen op grotere schaal mogelijk te maken. Eveneens zal ik ingaan op wat al deze ontwikkelingen betekenen voor het onderwijs in de informatica en natuurkunde.

## Parallel rekenen

Het eerste van de drie gebieden die ik wil behandelen is parallel rekenen. Het is evident dat computers steeds sneller worden. Zelfs spelletjescomputers van vandaag hebben meer rekenkracht dan de duurste supercomputers van nog niet zo lang geleden. Hoe spectaculair die snelheidsgroei ook mag zijn, zij wordt ruimschoots overtroffen door de *vraag* naar rekenkracht. Wetenschappers willen steeds uitdagender problemen oplossen, die zoveel rekenkracht vergen dat ze niet gedaan kunnen worden door één computer, ook niet de allersnelste. Voorbeelden zijn simulaties aan de atmosfeer, klimaatsveranderingen, vliegtuigen, sterrenstelsels, en moleculen [11]. Illustratief zijn de plannen van IBM om te gaan werken aan eiwitvouwing. Dit probleem uit de bio-informatica vergt nog een factor duizend meer rekenkracht dan welke hedendaagse toepassing dan ook [8]. De enige methode om aan deze vraag te voldoen is *parallel rekenen*. Hierbij werkt een groot aantal computers samen bij het oplossen van één probleem.

Parallel rekenen wint zienderogen aan belangstelling, en er bestaat zelfs een top-500 met de snelste parallelle computersystemen ter wereld, de zogeheten supercomputers<sup>1</sup>. De bovenste drie posities van die lijst worden ingenomen door machines uit het Accelerated Strategic Computing Initiative. Deze systemen worden gebruikt om kernbom-explosies te simuleren. NCF (de Nationale Computer Faciliteit) krijgt dit jaar een machine met 1024 processoren, waarmee ook Nederland hoog op de lijst komt.

Gecentraliseerde supercomputers hebben een enorme rekenkracht, maar ze hebben ook een nadeel, namelijk hun prijskaartje. Het gevolg is dat supercomputers gedeeld worden door heel veel gebruikers, waardoor het vrijwel onmogelijk is één toepassing langdurig te laten draaien op het hele systeem. Bovendien zijn supercomputers slecht geschikt voor interactief gebruik: een systeem van tientallen miljoenen guldens wil men niet laten wachten op een treuzelende gebruiker.

---

<sup>1</sup>Zie [www.top500.org](http://www.top500.org)

| Instelling       | Naam        | CPU type         | Aantal nodes | Netwerk               |
|------------------|-------------|------------------|--------------|-----------------------|
| Sandia           | Cplant      | Alpha 21264      | 592          | Myrinet               |
| Univ. New Mexico | Los Lobos   | Pentium          | 512          | Myrinet               |
| NASA Goddard     | HIVE        | Pentium Pro/III  | 332          | Fast/Gigabit Ethernet |
| Argonne          | Chiba City  | Dual Pentium III | 256          | Myrinet               |
| Los Alamos       | Avalon      | Alpha 21164      | 140          | Fast Ethernet         |
| UIUC             | NTSC        | Dual Pentium III | 128          | Myrinet               |
| Tennessee/ORNL   | High TORC   | Pentium III      | 128          | Gigabit Ethernet      |
| VU-FEW           | Betacluster | Pentium Pro      | 128          | Myrinet               |

Tabel 2: Voorbeelden van clustercomputers (bron: [1])

Een alternatief wordt gevormd door clustercomputers. Een *clustercomputer* is een verzameling PCs of werkstations verbonden door een lokaal netwerk, en bestaat dus geheel uit standaardcomponenten. Clustercomputers blijven qua absolute snelheid iets achter bij supercomputers, maar winnen het ruimschoots op prijs/prestatie-verhouding. Daardoor wordt het mogelijk een cluster aan te schaffen voor een kleinere groep gebruikers. Veel onderzoeksgroepen hebben nu al een grote clustercomputer in eigen beheer. Hierdoor krijgen gebruikers een grote hoeveelheid rekenkracht voor zichzelf beschikbaar. In Tabel 2 staan enkele voorbeelden van zulke clustercomputers. De meeste clusters zijn opgebouwd uit Pentiums of Alphas en hebben een Ethernet of Myrinet netwerk. Het aantal processoren loopt in de honderden.

De ontwikkeling van supercomputers naar clustercomputers lijkt opmerkelijk op die van mainframes naar minicomputers in de jaren zeventig en tachtig. Een clustercomputer wordt gebruikt door een kleine groep mensen (net als een minicomputer zoals de PDP-11). Voor sequentiële computers heeft deze trend zich voortgezet tot de personal computer, de PC. Het is zeker denkbaar dat clustercomputers dezelfde trend volgen, en dat we in de toekomst 'personal clustercomputers' krijgen. Ik denk dat de steeds verdergaande integratie van computerchips en componenten persoonlijke supercomputers binnen bereik brengen. Het IBM Blue Gene systeem is zelfs al een belangrijke stap in die richting; elk moederbord van Blue Gene zal zo'n 2000 processoren bevatten.

Een interessant gevolg zal zijn dat clustercomputers (door hun relatief kleine aantal gebruikers) slechts een deel van de tijd gebruikt worden. Voor geldschietters komt dat misschien over als een schok, maar ook deze ontwikkeling is dezelfde als die bij PCs: apparatuur die bedoeld is voor interactief gebruik zal ook vaak werkeloos zijn. Een positief gevolg is dat er wereldwijd een enorme rekencapaciteit beschikbaar zal zijn. Als we in staat zijn om deze rekencapaciteit te combineren worden zeer complexe berekeningen mogelijk. Dit parallel rekenen op wereldwijde computersystemen staat bekend onder de naam *distributed supercomputing*.

Er zijn al enkele interessante experimenten mee gedaan, zei het hoofdzakelijk op PCs en werkstations. Een bekend voorbeeld uit de cryptografie is een initia-

tief van het CWI in Amsterdam, de factorisatie van een RSA-155 getal. Hierbij werden 7 maanden lang 300 werkstations gebruikt die verspreid waren over de hele wereld. Dit voorbeeld verbleekt echter bij het SETI@home project, dat momenteel wordt uitgevoerd, sinds mei 1999. Het doel van SETI (Search for ExtraTerrestrial Intelligence) is het zoeken naar buitenaardse intelligentie. Hierbij worden 2 jaar lang met een radiotelescoop signalen uit de ruimte opgevangen. Het analyseren van deze signalen kost honderdduizenden jaren rekentijd. In het SETI@home project worden computers van vrijwilligers gebruikt om elk een deel van dit enorme rekenwerk te doen. Wie denkt dat niemand daar aan mee wil werken onderschat het enthousiasme van sciencefiction-liefhebbers. Het aantal deelnemers staat inmiddels op ruim 2 miljoen en de hoeveelheid verbruikte rekentijd op ruim 400.000 jaar<sup>2</sup>. Van ET is helaas nog geen spoor gevonden.

Hoewel niet iedereen de toepassing even serieus neemt, wijst SETI@home ons wel de weg om zeer grootschalige parallele systemen te bouwen. Het wereldwijde systeem waar SETI@home op draait is ordes van grootte krachtiger dan zelfs de snelste supercomputer uit de top-500. Deze aanpak van distributed supercomputing heeft recentelijk veel aandacht van het bedrijfsleven getrokken. Er zijn diverse bedrijven opgericht rond dit idee (b.v. Entropia, Applied Metacomputing, Distributed Science, Popular Power, Parabon, Porivo en Distributed Net). Toepassingen waar ze zich mee bezig houden zijn onder andere het bestuderen van influenza, proteïne sequentie analyse en cryptografie.

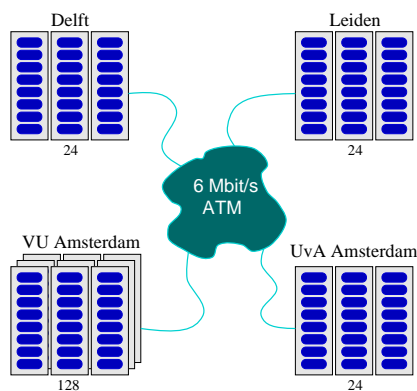
Hoewel de experimenten die ik beschreef hoofdzakelijk gedaan zijn op PCs en werkstations denk ik dat juist clustercomputers bij uitstek geschikt zijn voor distributed supercomputing. Een cluster geeft immers ordes van grootte meer rekenkracht dan een enkele PC. Bovendien is het netwerk binnen een cluster ordes van grootte sneller dan het Internet. Ik zal later in mijn lezing uitleggen hoe applicaties hier hun voordeel mee kunnen doen en de rekenkracht van een aantal clusters effectief kunnen combineren.

De onderzoekschool ASCI heeft een prototype gebouwd van zo'n geografisch gedistribueerd systeem dat bestaat uit een aantal clusters. Het systeem heeft de toepasselijke naam Distributed ASCI Supercomputer (DAS), want het heeft de capaciteit van een supercomputer en is gedistribueerd over verschillende locaties. DAS bestaat uit vier clustercomputers die geplaatst zijn bij verschillende universiteiten uit ASCI (zie Figuur 1). Iedere cluster bestaat uit een aantal PCs gekoppeld via een snel lokaal netwerk, Myrinet. De vier clusters zijn verbonden via een langeafstandsnetwerk. Elke universiteit kan de lokale cluster gebruiken voor bijvoorbeeld interactieve simulaties die vrij veel rekenkracht nodig hebben. Het gehele DAS systeem kan worden gebruikt voor zeer rekenintensieve toepassingen. Toepassingen die bestudeerd worden in het DAS project zijn onder andere beeldverwerking, N-deeltjes-simulaties, datamining, ray tracing, computerarchitectuur-simulaties, weersvoorspellingen, molecular dynamics,

---

<sup>2</sup>zie <http://setiathome.ssl.berkeley.edu/stats/totals.html>





Figuur 1: De Distributed ASCI Supercomputer (DAS)

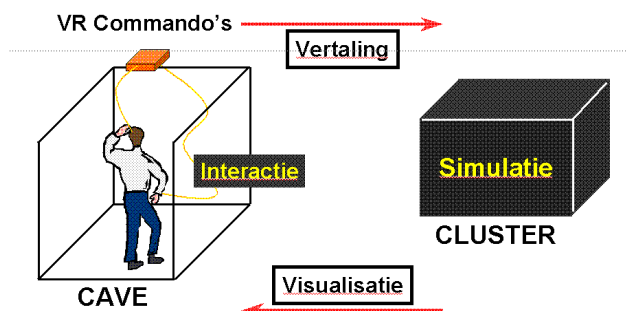
discrete event simulatie image-searching en web-caching.

De Faculteit der Exacte Wetenschappen van de VU is nauw betrokken bij dit onderzoek. De cluster van de faculteit, de Betacluster genaamd, is verreweg de grootste van de vier DAS-clusters. Dit is tot stand gekomen onder andere dankzij een investering van de VU om gemeenschappelijk onderzoek binnen de faculteit te bevorderen. De Betacluster wordt gebruikt voor toepassingen uit de quantum-scheikunde [20], vaste-stof-fysica, corneatopografie, onderwateracoustiek, tandheelkunde en game-tree search [18].

## Interactieve toepassingen

Het tweede onderzoeksgebied dat ik in de inleiding noemde betreft interactieve toepassingen. Vanuit de toepassingsgebieden komt een steeds grotere vraag naar een meer natuurlijke interactie met computersystemen. Op dit gebied zijn belangrijke doorbraken te verwachten. De technologie die interactieve toepassingen mogelijk maakt is die van virtuele werkelijkheden. Moderne Virtual Reality omgevingen zijn in staat om elke gewenste illusie te creëren. Een aansprekend voorbeeld is de CAVE, een dure kubus van 3 bij 3 bij 3 meter waarbij de gebruiker zich midden in een drie-dimensionale virtuele wereld waant. Het 3D effect wordt bereikt met speciale brillen; voor het onderdompelingseffect worden op de wanden gesynchroniseerde beelden geprojecteerd, berekend door een parallelle computer.

Virtual Reality omgevingen kunnen worden gebruikt om toepassingen meer interactief te maken en om de interactie te doen op een hoger abstractie niveau. Bij een interactieve toepassing kan de gebruiker controle uitoefenen op het verloop van berekeningen, in plaats van passief de resultaten af te wachten. Men kan een programma bijvoorbeeld vragen stellen om te zien of de berekeningen nog steeds relevant zijn, of kennis van de toepassing gebruiken om het programma



Figuur 2: Natuurlijke interactie

in de richting van de oplossing te sturen. Dit idee staat bekend als het human-in-the-loop principe. Essentieel hierbij is dat het computersysteem snel genoeg reageert om de aandacht van de gebruiker vast te houden. Parallel rekenen is vaak onmisbaar om zo'n soft real-time gedrag te bereiken.

Dankzij Virtual Reality omgevingen kan de interactie plaats vinden op een hoog abstractie niveau. Bij een simulatie van bijvoorbeeld een sterrenstelsel of een molecuul kan de gebruiker deeltjes oppakken en verplaatsen, waarna de nieuwe situatie automatisch weer wordt doorerekend. Dit wordt geïllustreerd in Figuur 2. Een simulatieprogramma wordt gedraaid op een parallelle machine en de resultaten (de uitvoer) van het programma worden gevisualiseerd in een virtual reality omgeving, zoals een CAVE. De gebruiker kan nu in deze visuele omgeving objecten manipuleren, bijvoorbeeld een ster verplaatsen, en daarmee het simulatieprogramma vragen de nieuwe situatie opnieuw door te rekenen en te visualiseren. De gebruiker stuurt dus de computerberekeningen door objecten in het natuurlijke domein van de toepassing te manipuleren, in plaats van commando's in te typen.

Er bestaan al enkele van dit soort interactieve programma's [12, 14]. Een bekend voorbeeld is het Molecular Docking Systeem van Argonne National Laboratory [14], waarmee biochemische processen worden bestudeerd, zoals ligande-proteïne-docking. Om deze interactie te kunnen voorspellen moet een rekenintensief minimalisatieprobleem worden opgelost met behulp van genetische algoritmen. De gebruiker in de CAVE kan het programma (dat draait op een parallelle machine) tijdelijk stoppen, in de virtuele wereld de ligande positioneren ten opzichte van het proteïne en dan de simulatie doorstarten. Op die manier kan de gebruiker het programma helpen om tot een oplossing te komen.

## Samenwerking op afstand

Het derde gebied dat ik in mijn inleiding beschreef is samenwerking op afstand. Deze ontwikkeling is belangrijk voor multidisciplinair onderzoek tussen weten-

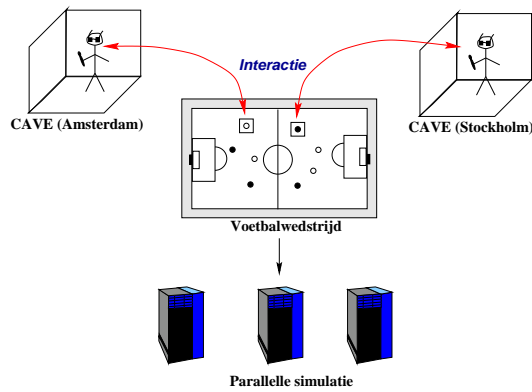
| Parallel rekenen | Virtual reality | Internet | Soort toepassing                                       |
|------------------|-----------------|----------|--|
| V                |                 | V        | Distributed supercomputing                             |
| V                | V               |          | Interactie via rekenintensieve simulaties              |
|                  | V               | V        | Tele-immersion   |
| V                | V               | V        | Samenwerking/interactie via rekenintensieve simulaties |

Tabel 3: Combinaties van de drie technologieën

schappers op verschillende plaatsen. De technologie die dit mogelijk maakt is die van langeafstandsnetwerken. Met name breedbandige netwerken (zoals het Gigaport project in Nederland), zullen voor verbindingen met een grote capaciteit (gigabits) gaan zorgen.

In wezen is dit proces van samenwerking op afstand al in gang gezet met de opkomst van elektronische nieuwsgroepen (Usenet) begin jaren tachtig. De enorme opmars van het Internet heeft gezorgd voor een grote interesse in toepassingen waarbij gebruikers kunnen samenwerken, bijvoorbeeld via teleconferenties of door toegang tot gemeenschappelijke documenten en gegevens. In de wetenschappelijke wereld zijn talrijke toepassingen en systemen onderzocht, zowel voor onderzoek als onderwijs.

Ook hier willen gebruikers dat de interactie (in dit geval tussen mensen) op een natuurlijke manier gebeurt, en niet door teksten in te typen en over te sturen. Deze hoog-niveau interactie kunnen we weer bereiken met virtual reality omgevingen. Door het koppelen van virtual reality omgevingen via netwerken kunnen we zelfs de illusie wekken van een directe interactie tussen mensen. Hierdoor kunnen wetenschappers samenwerken alsof ze zich op dezelfde plaats bevonden. Dit wordt aangeduid met 'tele-immersion' of 'networked virtual environments'. Veel onderzoek op dit gebied komt uit de militaire wereld, waarbij oorlogssituaties worden gesimuleerd met deelnemers die zich in verschillende landen bevinden [19]. Ook worden networked virtual environments steeds meer toegepast in de industrie, bijvoorbeeld bij het ontwerpen van auto's [13]. Hierbij kunnen ontwerpers op verschillende plaatsen samenwerken aan nieuwe auto's, die op reële grootte visueel worden nagebootst in een CAVE. Een ander bekend voorbeeld is een virtuele operatiekamer, waarbij artsen die zich op verschillende plaatsen bevinden een virtuele patiënt opereren [9]. Samenwerking is overigens niet alleen mogelijk via virtuele werelden maar ook via fysieke instrumenten. In het Globus project is een experiment gedaan waarbij de data van elektronenmicroscopen en röntgenapparatuur werd verwerkt op verschillende supercomputers in Amerika en gevisualiseerd voor gebruikers op grote afstand [6].



Figuur 3: Robocup

## Samenhang

Nu ik de drie gebieden wat uitvoeriger heb beschreven wil ik graag stilstaan bij de samenhang die ertussen is. De drie technologieën die ik beschreef kunnen op alle mogelijke manieren worden gecombineerd (zie Tabel 3) en iedere combinatie leidt tot een zinvol applicatiedomein. Door bijvoorbeeld parallel rekenen en Internet te combineren krijgen we distributed supercomputing, parallel rekenen over Internet. Interactieve toepassingen en tele-immersion zijn eveneens combinaties van twee technieken. De laatste combinatie is grootschalige parallelle computersystemen die via computernetwerken bestuurd worden vanuit virtuele werkelijkheden. Dit opent nieuwe, bijna sciencefiction-achtige mogelijkheden voor veel toepassingen.

In ons onderzoek binnen FEW proberen we toepassingen op te zetten die alle drie de gebieden integreren. Voor dit onderzoek gebruiken we toepassingen uit vele gebieden. Onze eerste toepassing komt uit de kunstmatige intelligentie, namelijk robotvoetbal. Robocup is een internationaal initiatief met als doel robots zelfstandig te laten voetballen, met en tegen andere robots. Dit kunnen echte robots zijn of computersimulaties. Zulke samenwerkende robots hebben veel andere toepassingen.

Wij hebben een interactieve visualisatie van Robocup in de CAVE ontwikkeld, met als doel de mens een voetbalwedstrijd te laten spelen met en tegen gesimuleerde spelers. Dit programma integreert de drie gebieden die ik beschreef (zie ook Figuur 3):

- De spelers worden gesimuleerd op verschillende machines, dus de toepassing is parallel. Elke speler is hierbij een autonoom proces. Dit is een wezenlijk verschil met voetbalspelletjes voor de PC en maakt onze resultaten algemeen bruikbaar voor interactie met willekeurige simulatieprogramma's.
- De interactie met dit parallelle simulatieprogramma vindt plaats op een hoog abstractie niveau, op een wel zeer natuurlijke manier: de speler in de

CAVE kan rondlopen over het virtuele veld en kan tegen een virtuele bal trappen.

- Het programma ondersteunt samenwerking op afstand, door mensen in CAVes op verschillende locaties deel te laten nemen aan één en dezelfde wedstrijd. Vorig jaar is hiertoe een experiment gedaan met een virtuele wedstrijd tussen personen in twee CAVes, één in Amsterdam en één in Stockholm, een afstand van ruim 1300 kilometer. Nederland won daarbij glorieus met 10-6. (Strafschoppen waren gelukkig niet nodig.)

Het Robocup programma heeft dus alle eerder genoemde ingrediënten van een moderne wetenschappelijke toepassing. Ondanks het speelse karakter van deze toepassing zijn we veel moeilijke problemen tegengekomen die ook zullen optreden bij andere toepassingen. Het meest fundamentele probleem is hoe te voorkomen dat vertragingen in het simulatieprogramma of het netwerk de natuurlijke interactie onmogelijk maken. Als het simulatieprogramma niet de actuele positie van de menselijke speler heeft, zal het verkeerde beslissingen gaan nemen. Bijvoorbeeld de speler wil de bal schieten maar het simulatieprogramma verbiedt dit omdat het denkt dat de bal te ver weg is. Dit probleem wordt nog versterkt bij samenwerking op afstand tussen mensen in verschillende CAVes. Dit onderzoek is dan ook zeer leerzaam voor wetenschappelijke toepassingen. Als we mensen op 1300 kilometer van elkaar kunnen laten deelnemen in een realistische voetbalsimulatie, moeten we ook in staat zijn om wetenschappers naar dezelfde molecuulsimulatie te laten kijken.

Net als bij het SETI@home project kan men zich afvragen of dit soort onderzoek een éénmalige activiteit is (in dit geval van voetballiefhebbers) of een voorbode van hoe computersystemen in de toekomst gebruikt kunnen gaan worden. Mijn stellige verwachting is het laatste. De voordelen van interactieve toepassingen zijn groot, en de technologische vooruitgang zal ze binnen bereik brengen. Clustercomputing zorgt voor relatief goedkope rekenkracht, Virtual Reality omgevingen openen nieuwe werelden en de gigabit netwerken die alles aan elkaar gaan koppelen staan voor de deur. De grootste vraag is echter of we in staat zullen zijn om de geavanceerde software te maken die voor dit soort toepassingen nodig is. Dit brengt me bij het volgende onderdeel van mijn lezing.

## Onderzoek

Er is nog veel onderzoek nodig om het soort toepassingen dat ik heb beschreven op grote schaal mogelijk te maken. Een eerste stap is het ontwikkelen van een infrastructuur om deze toepassingen te ondersteunen, een soort bedrijfssysteem voor wereldwijde toepassingen. Er zijn veel onderzoeksprogramma's die streven naar een nieuwe, wereldwijde computer-infrastructuur voor met name wetenschappelijke toepassingen. Het doel hierbij is het koppelen van mensen,

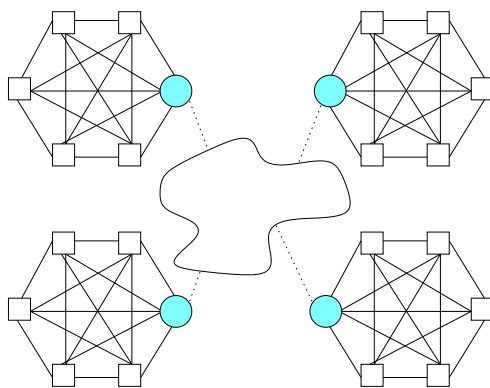
computers, data en instrumenten zodat iedere geautoriseerde gebruiker toegang krijgt tot programma's en gegevens uit de hele wereld en kan samenwerken met gebruikers elders. Het belangrijkste aspect is om die koppeling op een *transparante* manier te doen, dat wil zeggen zodanig dat gebruikers niets meer merken van de fysieke distributie van het hele systeem. Vaak wordt de vergelijking aangegaan met het elektriciteitsnetwerk, waar iedereen gebruik van maakt zonder te weten hoe het netwerk in elkaar zit. De Engelse naam voor zo'n wereldwijd transparant computersysteem is *computational grid* [7], in analogie met de power grid, het elektriciteitsnetwerk. Bij elektriciteitsnetwerken is deze transparantie vanzelfsprekend. Bij computersystemen daarentegen is zo'n transparante koppeling nog ver weg. Eén van de moeilijkste problemen is hoe de software-architectuur voor een computational grid er uit moet zien. De grote verscheidenheid aan operating systemen, processoren en netwerken maakt het moeilijk om software te maken die overal draait. Ook beveiliging, fout-bestendigheid en accounting zijn uitdagende problemen. Gedistribueerde toepassingen worden momenteel gemaakt met een mengmoes van technieken, protocollen en modellen, die niet bepaald een samenhangend geheel vormen. Het verbeteren van deze coherentie is een veel terugkerend onderzoeksthema, in projecten zoals Globus, Legion en Globe. Ik denk dat er veel meer ervaring met toepassingen nodig is om gefundeerde uitspraken te kunnen doen over hoe zo'n wereldwijde architectuur er uit moet zien. Ik wil me hier dan ook beperken tot twee problemen waar ik in mijn onderzoek naar kijk: communicatie en toepassingen.

## Communicatie

Eén van de belangrijkste problemen bij alle soorten nieuwe toepassingen is *communicatie*. Communicatie tussen computers is nodig om acties te synchroniseren en om data uit te wisselen, net zoals mensen die samenwerken regelmatig met elkaar moeten overleggen. De communicatiesnelheid is hierbij van groot belang. Snelle communicatie is nodig bij parallele toepassingen om de overhead van samenwerking klein te houden, en bij interactieve toepassingen om een natuurlijke interactie mogelijk te maken.

Wat men zich vaak niet realiseert is dat bij lokale netwerken de communicatiesnelheid grotendeels wordt bepaald door software. Een goed voorbeeld is het feit dat we de communicatie in Java (Remote Method Invocation) een factor 35 sneller hebben weten te maken, uitsluitend door het veranderen van software [15]. Zulke communicatiesoftware is uiterst ingewikkeld, en er zijn letterlijk proefschriften over vol te schrijven [4]. Het ontwikkelen van zowel laag-niveau netwerk protocollen [3, 5] als hoger-niveau programmeeromgevingen (zoals Java) zijn zeer belangrijk [2, 4].

Voor langeafstandsnetwerken is communicatie een nog moeilijker probleem. Communicatie over zulke netwerken is ordes van grootte trager dan over een lokaal netwerk. Bovendien wordt hier de snelheid niet bepaald door software,

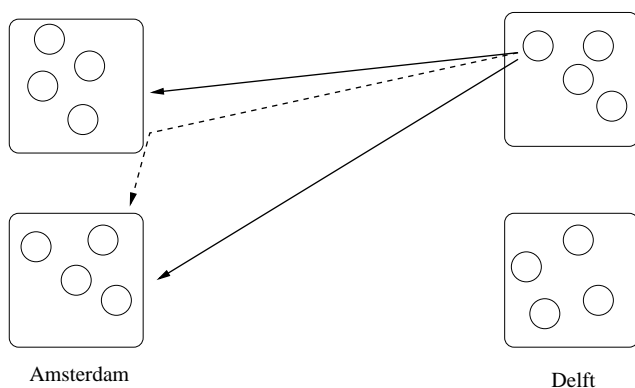


Figuur 4: Een hiërarchisch computersysteem [10]

maar door hardware. Ook wordt de lichtsnelheid een beperkende factor, waar software-optimalisaties weinig kans tegen maken. Het omgaan met trage communicatie in wereldwijde systemen is derhalve een fundamenteel probleem. Dit probleem speelt met name bij parallelle programma's die draaien op wereldwijde systemen, wat ik eerder distributed supercomputing heb genoemd. Men kan zich afvragen of het niet te hoog gegrepen is om een parallel programma te draaien op computers over de hele wereld, gezien de trage communicatie. De huidige experimenten beperken zich tot toepassingen die kunnen worden opgesplitst in zeer grote, onafhankelijke deeltaken. Bij SETI@home duurt elke deeltaak gemiddeld zelfs een dag. De meeste parallelle toepassingen zijn helaas niet zo makkelijk op te splitsen en hebben veel meer communicatie nodig.

Toch denk ik dat deze problemen op te lossen zijn, namelijk door computational grids niet te bouwen uit losse PCs maar uit grotere eenheden, zoals clustercomputers. Op die manier ontstaat een *hiërarchische* structuur, die vaak kan worden benut om parallelle programma's efficiënt te maken. De communicatie binnen een lokale cluster zal snel zijn en alleen de communicatie tussen de clusters is traag. Een concreet voorbeeld hiervan is het DAS systeem. Een abstract model van een hiërarchisch systeem is gegeven in Figuur 4.

Ik zal aan de hand van een simpel voorbeeld uitleggen hoe zo'n hiërarchische structuur ons helpt. Het voorbeeld is een N-deeltjes-simulatie, veel gebruikt in de fysica en astronomie. Er moeten hierbij krachten worden uitgerekend tussen elk tweetal deeltjes (zie Figuur 5). Om de kracht op een bepaald deeltje te bepalen is informatie nodig over (in principe) elk ander deeltje. Dit zal veel communicatie genereren over de langeafstandsnetwerken, omdat elke machine informatie over elk deeltje op gaat halen. Een eenvoudige optimalisatie is informatie over ieder deeltje slechts één maal over het langeafstandsnetwerk te versturen en vervolgens binnen elke cluster door te sturen. Verreweg de meeste communicatie gebeurt dan lokaal, waardoor het programma efficiënt zal werken. De reden dat het originele programma deze optimalisatie niet deed was dat het uitging van een



Figuur 5: N-deeltjes simulatie op DAS

niet-hiërarchisch model voor een computersysteem, met dezelfde communicatiesnelheid tussen alle processoren, en daar heeft de optimalisatie geen zin. Dit simpele voorbeeld geeft dus goed het verschil weer tussen een gewoon en een hiërarchisch systeem.

Bij ons onderzoek op DAS hebben we dit soort optimalisaties bestudeerd [16]. Onze verrassende conclusie is dat veel soorten toepassingen bestand zijn tegen de hoge communicatietijden, en er dus veel meer mogelijkheden voor distributed supercomputing zijn dan men zou verwachten. Een volgende stap in ons onderzoek is het bedenken van programmeeromgevingen die beter geschikt zijn voor hiërarchische computersystemen. Wij onderzoeken enkele mogelijkheden hier. Eén idee is om communicatie-primitieven te gebruiken waarmee een groot aantal processoren communiceren, en die primitieven te optimaliseren voor hiërarchische systemen. Een voorbeeld dat wij hebben onderzocht in het MagPIe project [10] is collectieve communicatie. Een andere aanpak die we onderzoeken is uit te gaan van een programmeermodel dat zelf hiërarchisch is, zoals het divide-and-conquer model. Ik denk overigens dat dit onderzoek niet alleen belangrijk is voor distributed supercomputing. Er zijn duidelijke aanwijzingen dat computersystemen in het algemeen steeds meer hiërarchisch zullen worden, omdat dat de enige manier is om zeer grootschalige systemen te bouwen. Ook IBM's Blue Gene systeem voor eiwit-vouwing zal sterk hiërarchisch zijn opgebouwd; het bestaat uit moederborden met elk 64 multiprocessor-chips, die elk weer 32 processoren bevatten [8].

## Toepassingen

Een andere interessante onderzoeksvraag is wat voor omgevingen nodig zijn om alle soorten toepassingen die ik beschreven heb te realiseren. Zulke omgevingen moeten flexibel zijn en een breed scala van toepassingen ondersteunen, zoals parallel rekenen, interactie in virtuele werkelijkheden en samenwerking op afstand. Vooral interactie met simulatieprogramma's is een relatief nieuw gebied, met tal



van nog onopgeloste problemen. Een belangrijke vraag is bijvoorbeeld in hoeverre het mogelijk is om interactie te plegen met een programma zonder kennis van de interne werking van het programma te hebben en zonder het programma te veranderen. Dit laatste is vaak onmogelijk of onwenselijk. Het simulatieprogramma moet derhalve gezien worden als een zwarte doos, en alle interacties moeten plaats vinden op het niveau van de invoer en uitvoer van het programma. Een andere vraag is wat voor soort interacties mogelijk zijn met een simulatieprogramma en hoe menselijke interacties moeten worden vertaald naar acties voor het programma.

Om dit soort vragen te onderzoeken hebben we een eerste toolkit gemaakt die interactieve toepassingen in virtuele omgevingen ondersteunt, CAVEstudy genaamd [17]. Het ontwerp van deze toolkit is gestuurd door een aantal wetenschappelijke toepassingen, met name molecuulsimulaties en simulaties van lasers, en ook door ons Robocup experiment. Een vorm van interactie die we bijvoorbeeld bestuderen met CAVEstudy is virtueel meten. De vraag is of het mogelijk is om metingen te doen binnen de virtuele wereld, net zoals fysici in de echte wereld metingen doen. Een toepassing die we hiervoor bestuderen is ion-recombinatie. Hierbij wordt een parallel simulatieprogramma gebruikt dat het gedrag van hoge-energie deeltjes in een vloeistof nabootst. De resultaten worden gevisualiseerd, en de gebruiker kan bijvoorbeeld de beginpositie van elektronen veranderen. Daarnaast kan de gebruiker de stroom van deeltjes door een cilindervormig vlak meten, door een cilinder te bewegen in de virtuele ruimte. Interessant is dat in de werkelijke wereld de interacties tussen de deeltjes niet kunnen worden doorgemeten, aangezien die op een picoseconde tijdschaal plaatsvinden. De virtuele aanpak opent hier dus echt nieuwe deuren. Bovendien is deze aanpak geschikt voor gebruikers zonder expertise in programmeren, aangezien de meting geheel in de visuele ruimte gebeurt.

## Onderwijs

Hoewel ik me hier geconcentreerd heb op onderzoek, zijn de ontwikkelingen die ik beschreef beslist ook belangrijk voor onderwijs. Parallel programmeren is al jarenlang een populair informatica vak dat ook veel afstudeerders aantrekt. Wetenschappelijke visualisatie is een belangrijk studieonderdeel bij natuurkunde. Een goede versterking voor zowel natuurkunde als informatica studenten is de integratie van deze twee gebieden. Wij hebben hier in een OKF project van de VU twee jaar lang aan gewerkt. Het resultaat is een breder en goed afgestemd aanbod van onderwijs aan parallel rekenen en visualisatie. Bij de Divisie Wiskunde & Informatica zal dat gebeuren in de vorm van een nieuwe afstudeervariant. Een ander concreet resultaat is het nieuwe vak Computer Graphics, dat dit semester onder zeer veel belangstelling van start is gegaan en dat is opgezet door de twee divisies samen.

Voor zowel het onderwijs als het onderzoek is de beschikbaarheid van een goede lokale infrastructuur essentieel. Zeer verheugend zijn dan ook de recente ontwikkelingen op dit gebied. De Stichting SURF heeft een samenwerkingsproject op onderwijsgebied tussen de VU en de Universiteit Twente goedgekeurd waarin een lokale visualisatie-infrastructuur zal worden opgezet binnen de faculteit. Deze krijgt waarschijnlijk de vorm van een vele meters brede video-wand met mogelijkheden voor drie-dimensionale projectie. Op het gebied van parallelle computersystemen heeft de faculteit gelukkig al jarenlang uitstekende faciliteiten gehad, en ook de nabije toekomst is rooskleurig: NWO heeft eerder dit jaar de opvolger van het DAS systeem goedgekeurd, zodat er een nieuwe gedistribueerde clustercomputer zal worden gebouwd, DAS-2, waarvan één cluster bij de VU zal komen. Ik ben ervan overtuigd dat de combinatie van de rekenkracht van DAS-2 en een lokale virtual-reality-omgeving grote mogelijkheden biedt voor zowel onderwijs als onderzoek in de natuurwetenschappen.

## Conclusies

Mijnheer de Rector Magnificus,  
Geachte toehoorders,

Ik hoop u ervan te hebben overtuigd dat we aan de vooravond staan van zeer boeiende veranderingen in de informatica en wetenschappelijke toepassingen. Technologische ontwikkelingen als clustercomputers, virtual realities en Internet openen de weg voor nieuwe soorten toepassingen. Hierdoor kunnen wetenschappers problemen simuleren en visualiseren op een manier die tot voor kort ondenkbaar was. Virtueel kan alles. Om dit soort nieuwe toepassingen op grote schaal mogelijk te maken is nog veel onderzoek nodig, zowel fundamenteel als toepassingsgericht. Ik denk dat de Faculteit der Exacte Wetenschappen een belangrijke rol kan spelen bij dit onderzoek en dat we interessante tijden tegemoet gaan.

## Dankwoord

Nu ik aan het einde gekomen ben van mijn lezing wil ik graag enkele instituten en personen bedanken. Ik dank het Bestuur van de Vereniging voor Christelijk Wetenschappelijk Onderwijs en het College van Bestuur van de Vrije Universiteit voor mijn benoeming en het in mij gestelde vertrouwen. Ik dank het College van Bestuur in het bijzonder voor het honoreren van twee belangrijke subsidies, de Betacluster en de USF-subsidie, die mijn onderzoek een belangrijke impuls hebben gegeven. De Faculteit der Exacte Wetenschappen en de divisies Wiskunde & Informatica en Natuurkunde & Sterrenkunde hebben gezorgd voor een uitstekende omgeving om dit onderzoek te doen.

Ik ben veel dank verschuldigd aan een groot aantal personen. Ik dank Andy Tanenbaum voor zijn enorme bijdragen in mijn vorming als wetenschapper. Ik dank alle medewerkers van mijn huidige onderzoeksgroepen bij informatica en natuurkunde en van mijn voormalige PIONIER-onderzoeksgroep voor het voortreffelijke werk dat zij allen met veel enthousiasme hebben gedaan. Dick Grune heeft in deze periode voor welkome afwisseling gezorgd, door er op te letten dat er op ieder moment wel een boek was waar we aan konden schrijven. Een bijzonder woord van dank is meer dan op zijn plaats voor Hans Spoelder, die de meeste ideeën heeft aangedragen voor interactieve toepassingen, van virtueel meten tot virtuele voetbalwedstrijden. Dit laatste project sluit aan bij een landelijk Robocup project, een initiatief van Frans Groen, mijn voorganger bij Natuurkundige Informatica. Marjolein, mijn schoonouders en overige familie zorgden ervoor dat het in de reële wereld nog veel leuker is dan in de virtuele wereld. Ik dank u allen voor uw aandacht.

Ik heb gezegd.

# Referenties

- [1] I. Ahmad. Gigantic Clusters: Where are They and What are They Doing? *IEEE Concurrency*, 8(2):83–85, April–June 2000.
- [2] H. E. Bal, R. Bhoedjang, R. Hofman, C. Jacobs, K. Langendoen, T. Rühl, and F. Kaashoek. Performance Evaluation of the Orca Shared Object System. *ACM Transactions on Computer Systems*, 16(1):1–40, February 1998.
- [3] R. A. F. Bhoedjang, T. Rühl, and H. E. Bal. User-Level Network Interface Protocols. *IEEE Computer*, 31(11):53–60, November 1998.
- [4] R.A.F. Bhoedjang. *Communication Architectures for Parallel-Programming Systems*. PhD thesis, Vrije Universiteit, Amsterdam, The Netherlands, June 2000.
- [5] R.A.F. Bhoedjang, K. Verstoep, T. Rühl, H.E. Bal, and R.F.H. Hofman. Evaluating Design Alternatives for Reliable Communication on High-Speed Networks. In *Proc. 9th Int. Conference on Architectural Support for Programming Languages and Operating Systems (ASPLOS-9)*, Cambridge, MA, November 2000.
- [6] I. Foster, J. Insley, G. von Laszewski, C. Kesselman, , and M. Thiebaux. Distance Visualization: Data Exploration on the Grid. *IEEE Computer*, 32(12):36–43, Dec. 1999.
- [7] I. Foster and C. Kesselman, editors. *The GRID: Blueprint for a New Computing Infrastructure*. Morgan Kaufmann, 1998.
- [8] L. Geppert. Microprocessors: the Off-Beat Generation. *IEEE Spectrum*, 37(7):44–49, July 2000.
- [9] M.J. Johnson, M.C. Spence, and L. Chao. Using the NREN Testbed to Prototype a High-performance Multicast Application. In *Proc. SC'99*, Portland, OR, November 1999.
- [10] T. Kielmann, R.F.H. Hofman, H.E. Bal, A. Plaat, and R.A.F. Bhoedjang. MAGPIE: MPI's Collective Communication Operations for Clustered Wide Area Systems. In *Seventh ACM SIGPLAN Symposium on Principles and Practice of Parallel Programming (PPoPP'99)*, pages 131–140, Atlanta, GA, May 1999.
- [11] A.E. Koniges, editor. *Industrial Strength Parallel Computing*. Morgan Kaufmann, 2000.
- [12] J. Leech, J.F. Prins, and J. Hermans. SMD: Visual Steering of Molecular Dynamics for Protein Design. *IEEE Computational Science & Engineering*, 3(4):38–45, Winter 1996.

- [13] J. Leigh, A.E. Johnson, T.A. DeFanti, and M. Brown. A Review of Tele-Immersive Applications in the CAVE Research Network. In *IEEE Virtual Reality'99*, pages 180–187, 1999.
- [14] D. Levine, M. Facello, P. Hallstrom, G. Reeder, B. Walenz, and F. Stevens. Stalk: An Interactive System for Virtual Molecular Docking. *IEEE Computational Science*, 4(2):55–65, April-June 1997.
- [15] J. Maassen, R. van Nieuwpoort, R. Veldema, H.E. Bal, and A. Plaat. An Efficient Implementation of Java's Remote Method Invocation. In *Seventh ACM SIGPLAN Symposium on Principles and Practice of Parallel Programming (PPoPP'99)*, pages 173–182, Atlanta, GA, May 1999.
- [16] A. Plaat, H. Bal, and R. Hofman. Sensitivity of Parallel Applications to Large Differences in Bandwidth and Latency in Two-Layer Interconnects. In *High Performance Computer Architecture HPCA-5*, Orlando, FL, January 1999.
- [17] L. Renambot, H.E. Bal, D. Germans, and H.J.W. Spoelder. CAVEStudy: an Infrastructure for Computational Steering in Virtual Reality Environments. In *9th IEEE International Symposium on High Performance Distributed Computing*, pages 239–246, Pittsburgh, PA, August 2000.
- [18] J.W. Romein, A. Plaat, H.E. Bal, and J. Schaeffer. Transposition Table Driven Work Scheduling in Distributed Search. In *16th National Conference on Artificial Intelligence (AAAI)*, pages 725–731, Orlando, FL, July 1999.
- [19] S. Singhal and M. Zyda. *Networked Virtual Environments: Design and Implementation*. Addison-Wesley, 1999.
- [20] S.J.A. van Gisbergen, C. Fonseca Guerra, and E.J. Baerends. Towards Excitation Energies and (Hyper)Polarizability Calculations of Large Molecules: Application of Parallelization and Linear Scaling Techniques to Time-Dependent Density Functional Response Theory. *Journal of Computational Chemistry* (accepted for publication), 2000.